Ciencia e Ingeniería
Revista Interdisciplinar de Estudios en Ciencias Básicas e Ingenierías.
Año 2015, Enero-Junio, Vol. (2) N° (1) ISSN 2389-9484.
Universidad de La Guajira, Facultades de Ciencias Básicas y Aplicadas e Ingeniería.
La Guajira-Colombia.
Revista en Línea http://revistas.uniguajira.edu.co/index.php/cei



EVALUACIÓN MEDIANTE DIFERENCIA FINITA DE TRANSFERENCIA DE CALOR QUE OCURREN EN EL PROCESO DE REDUCCIÓN DE ALUMINIO

FINITE DIFFERENCE EVALUATION BY HEAT TRANSFER TO OCCUR IN THE PROCESS OF ALUMINUM REDUCTION

A. Oliver, E. Lobo, H. Martínez y R Acuña

Universidad Nacional Experimental "Antonio José de Sucre" (UNEXPO)
aoliver@unexpo.edu.ve

Recibido: marzo 10 de 2014 Aceptado: mayo 05 de 2015

RESUMEN

El aluminio es uno de los metales de mayor uso industrial y domestico debido a su baja densidad, alta conductividad térmica y eléctrica, es liviano y tiene buenas propiedades mecánicas. Este elemento se obtiene de la alúmina, siendo la temperatura de fusión de la alúmina 2040ºC; esta es demasiada elevada para poder abordar el proceso industrialmente. Por lo que, aplicando energía eléctrica por kilogramo de alúmina [6.3 -14] Kwh/KgAl, a través de un método de electrólisis en una celda de criolita (Na_3AlF_6) fundida, se baja la temperatura del proceso a 1000ºC. La gran corriente eléctrica y la alta temperatura en la celda traen como consecuencia, entre otros, desgate de ánodos, formación de costras en las paredes de la celda, efecto anódico no deseado, contaminación e inestabilidad en el control del proceso. Con el fin de disminuir el problema, abordamos el método numérico de diferencias finitas para resolver la ecuación de transferencia de calor asociadas al sistema físico de la celda. Para esto, estudiamos los perfiles de temperaturas en el espacio y el tiempo mediante las herramientas computacionales en el simulador PDETOOL de MATLAB y el manipulador y simulador matemático MAPLE. Finalmente, los resultados analíticos y numéricos alcanzan una buena aproximación convergente.

PALABRAS CLAVE: Reducción de aluminio, Transferencia de calor, Diferencia finita, Pruebas de convergencia y estabilidad.

ABSTRACT

Aluminum is one of the largest industrial metals and domestic use because of its low density, high thermal and electrical conductivity, is lightweight and has good mechanical properties. This element is obtained from the alumina, being the melting temperature of alumina 2040ºC; This is too high to approach the process industrially. So, applying electrical energy per kg of alumina [6.3 -14] Kwh / kgal, through a method of electrolysis in a cell of cryolite (Na3AlF6) melt, the process temperature is lowered to 1000 ° C. The high power and high temperature in the cell brought as a consequence, among others, desgate anode, crusting on the walls of the cell, anode effect unwanted pollution and instability in the process control. To lessen the problem, we address the finite numerical method for solving the heat transfer equation related to physical differences in the cell system. For this study the temperature profiles in space and time using computational tools in MATLAB PDETOOL simulator and the manipulator and MAPLE mathematical simulator. Finally, analytical and numerical results reach a good convergent approach.

Keywords: Reduction of aluminum, heat transfer, finite difference, convergence and stability tests.

1. INTRODUCCIÓN

El aluminio se produce a través de un proceso de reducción electrolítica en una celda. Los componentes principales que reaccionan en la celda son el polvo de alúmina u óxido de aluminio (Al_2O_3), junto a un catalizador formado por un baño químico donde su principal componente es la criolita (Na3AlF6), en menor cantidad se agregan otros compuestos para mejorar el proceso (Peter, 2013). A través de los ánodos se hace pasar una corriente de 320KAmp, la tensión anódica aplicada con respecto al cátodo es de 4.5V, esto transforma la alúmina sólida (polvo de alúmina) en aluminio líquido a un rango de temperatura promedio de 960ºC. La técnica más usada consiste en el proceso de reducción elaborado por los investigadores Paul Héroult y Charles Hall en 1886. En la figura 1, se muestra este proceso de reducción electrolítica y sus principales componentes (Peter, 2013).

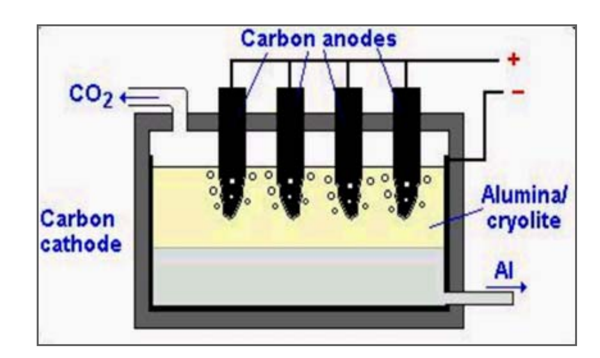


Figura 1. Diagrama del proceso Hall-Héroult

La principal reacción química que ocurre en este proceso se puede representar por la siguiente ecuación

$$2Al_2O_{3(Disuelta)} + 3C_{(Sólido)} \Rightarrow 4Al_{(Líquido)} + 3CO_{2(Gas)} \qquad (1)$$

Las soluciones que se han planteado para modelar los problemas presentados en esta reacción electroquímica (1) tienen un alto grado de complejidad debido a la cantidad de variables no independientes que intervienen en este proceso. Las variables son la corriente eléctrica, la temperatura, campo electromagnético, la presión de gases, entre otros. Todo el proceso de transferencia de calor está caracterizado por la ecuación no lineal de difusión de calor en el espacio (Gutierez y Troyani, 1999), (Gutierez y Troyani, 2004).

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial T}{\partial z}\right) + \dot{q} = C\rho\frac{\partial T}{\partial t}. \qquad (2)$$

Donde T es la temperatura, $\dot{q}$ es la generación de calor, k la conductividad térmica, C calor específico, t el tiempo y ρ es la densidad del material.

Este artículo presenta en la parte I y II la descripción del proceso de reducción de aluminio, los modelos y las ecuaciones analíticas que lo rigen y se discretizan las ecuaciones en 1D. La sección III, describe el esquema del seudocódigo para 1D en lenguaje Maple. La parte IV y V se generan las simulaciones en Pdetool y Maple. Finalmente, en VI se analizan los resultados y en VII las conclusiones.

II. ECUACIONES CARACTERÍSTICAS DEL PROCESO

El aluminio en su fase líquida dentro de la celda se puede aproximar a una cuba tipo ladrillo a fin de aplicar métodos numéricos y obtener una solución aproximada [2]. La figura 2 es un corte transversal de esta celda donde se muestran la dimensión y sus principales elementos: ánodo, cátodo, baño electrolítico (criolita) y el aluminio líquido.

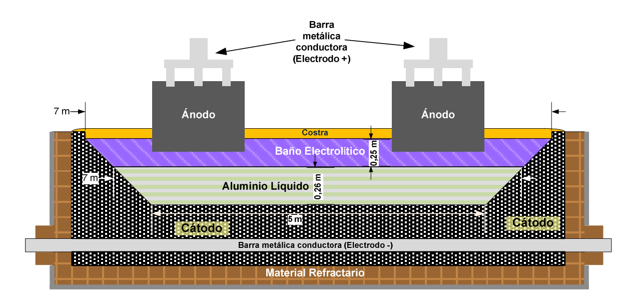


Figura 2. Corte transversal de una celda de reducción

Las ecuaciones (1) y (2) dirigen del proceso químico y térmico respectivamente que se lleva a cabo en la celda. No obstante, la fórmula (2) de difusión necesita el parámetro voltaje-corriente de generación de calor.

$$\dot{q} = \sigma_e [\vec{\nabla} V]^2 \tag{3}$$

Donde σ_e es la conductividad eléctrica y V el voltaje entre el ánodo y cátodo de la celda electrolítica.

2.1 Esquema de diferencia finita en 2D

Para el desarrollo de este trabajo consideramos a la conductividad térmica k de la ec. (2) constante. Siendo esto así, se puede escribir de la siguiente forma

$$\frac{k}{\rho c_P}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) + \frac{\dot{q}}{\rho c_P} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\alpha\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) + \frac{\dot{q}}{\rho c_P} = \frac{\partial T}{\partial t} \tag{4}$$

donde $\alpha = k / \rho Cp$.

Los términos en segunda derivada, $\partial^2 T/\partial x^2$ y $\partial^2 T/\partial y^2$, de la ec. (4) se pueden desarrollar tomando aproximaciones en la serie de Taylor [4], con dependencia en una sola coordenada, de la forma

$$T(x_{i+1}) = T(x_i) + T'(x_i)(h) + T''(x_i)\frac{(h)^2}{2} + T'''(x_i)\frac{(h)^3}{6} + \mathrm{O}(h^4) \tag{5}$$

y

$$T(x_{i-1}) = T(x_i) + T^{'}(x_i)(-h) + T^{''}(x_i)\frac{(-h)^2}{2} + T^{'''}(x_i)\frac{(-h)^3}{6} + \mathrm{O}(h^4). \qquad (6)$$

Aquí ('), ('') y (''') son la 1ra, 2da y 3ra derivada respectivamente. Si truncamos la serie hasta segundo orden, obtenemos:

$$T^{''}(x_i) = \frac{T(x_{i+1}) - 2T(x_i) + T(x_{i-1})}{h^2} + \mathrm{O}(h^2). \qquad (7)$$

El término $\mathrm{O}(h^2)$ es el error de truncamiento de la serie. Ahora bien, incorporamos la ec.(7) como el esquema de discretización de la ec.(4), la cual permite escribir las segundas derivadas aproximadas (o de diferencia finitas), en el punto nodal *i, j*, de la forma

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{i,j} \approx \left(\frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta x^2}\right) + T(\Delta x^2) \qquad (8)$$

y

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right|_{i,j} \approx \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta y^2}\right) + T(\Delta x^2), \qquad (9)$$

Donde Δx y Δy definen las dimensiones de cada nodo y los subíndices *i* y *j* sirven para designar las posiciones *x* y *y* de los puntos nodales discretos. La aproximación en diferencia finitas para la derivada respecto el tiempo en la ec.(4) se expresa de la forma

$$\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{i,j} = \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n}}{\Delta t} \qquad (10)$$

Donde Δt es el intervalo de tiempo entre cálculos sucesivos, el superíndice *n* se utiliza para denotar la dependencia con respecto al tiempo de *T*, y la derivada con respecto al tiempo se expresa en términos de la diferencia en temperatura asociada con los tiempos nuevo (*n+1*) y anterior (*n*). Esto se muestra gráficamente en la figura 3.

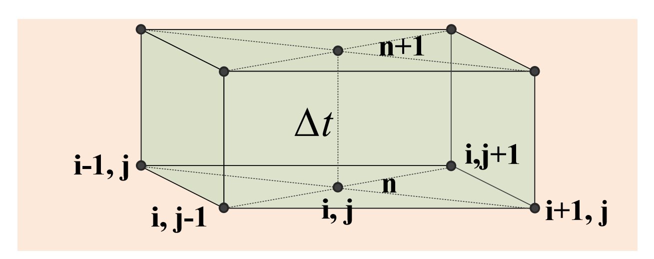


Figura 3. Modelo cúbico de celda para representar los nodos en los tiempos n y (n+1)

Haciendo $Q = \dot{q}$ y sustituyendo las ecuaciones. (8), (9) y (10) en (4), se obtiene la forma explícita de la ecuación en diferencia finitas para el nodo interior *i, j*

$$\frac{T_{i,j}^{n+1}-T_{i,j}^{n}}{\Delta t}=\alpha[\frac{T_{i,j+1}^{n}-2T_{i,j}^{n}+T_{i,j-1}^{n}}{\Delta x^2}+\frac{T_{i+1,j}^{n}-2T_{i,j}^{n}+T_{i-1,j}^{n}}{\Delta y^2}]+\frac{Q_{i,j}^{n}}{\rho c_P}. \quad (11)$$

Reordenando, obtenemos

$$T_{i,j}^{n+1}=T_{i,j}^{n}+\frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2}\left(T_{i,j+1}^{n}-2T_{i,j}^{n}+T_{i,j-1}^{n}\right)+\frac{\alpha\Delta t}{\Delta y^2}\left(T_{i+1,j}^{n}-2T_{i,j}^{n}+T_{i-1,j}^{n}\right)+\frac{Q_{i,j}^{n}\Delta t}{\rho c_P}. \quad (12)$$

Esta última ecuación es explícita, pues las temperaturas nodales desconocidas para el tiempo nuevo se determinan de manera exclusiva mediante temperaturas nodales conocidas en el tiempo anterior. Es decir, la ecuación (12) proporciona la distribución transitoria de temperatura al avanzar en el tiempo con el uso de intervalos de Δt.

En el caso del esquema de diferencias finitas implícito, se puede obtener una reducción en la cantidad de tiempo. Para esto, se evalúan todas las otras temperaturas en el nuevo tiempo ($n+1$), en lugar del tiempo anterior (n). Se considera entonces que la ecuación (4) proporciona una aproximación en diferencias hacia atrás para la derivada con respecto al tiempo. Entonces, reordenando nuevamente en (12), distribuimos los términos $n+1$ en el lado izquierdo y los términos con n en el lado derecho

$$s_y T_{i+1,j}^{n+1}+(1+2s_y+2s_x)T_{i,j}^{n+1}-s_y T_{i-1,j}^{n+1}-s_x T_{i,j+1}^{n+1}-s_x T_{i,j-1}^{n+1}=T_{i,j}^{n}+\frac{Q_{i,j}^{n}\Delta t}{\rho c_P} \quad (13)$$

Donde por comodidad se ha tomado $s_x=\alpha\Delta t/\Delta x^2$ y $s_y=\alpha\Delta t/\Delta y^2$. De la ec.(13) es evidente que la temperatura nueva del nodo i,j depende de las temperaturas nuevas de sus nodos contiguos que, en general, se desconocen. Por tanto, para determinar las temperaturas nodales desconocidas en $t+\Delta t$, las correspondientes ecuaciones nodales deben resolverse simultáneamente.

2.2 Definición de convergencia y estabilidad

Se dice que una solución numérica converge a la solución analítica cuando para cada punto, en el espacio de las variables independientes, la primera tiende a la segunda al refinar la grilla de cálculo, es decir

$$T_j^n \underset{\substack{\Delta t\to 0\\ \Delta x\to 0\\ x_j\ fijo\\ t^n\ fijo}}{\longrightarrow} T(x_j,t^n) \quad (14)$$

Nótese que al efectuar el paso al límite indicado en la Ec. (14) los índices j y n deben variar (específicamente; $j,n\to\infty$) para que x_j y t^n permanezcan fijos (por ejemplo, $x_j=j\Delta x$ y $t^n=n\Delta t$).

La estabilidad de la solución numérica respecto de la analítica significa acotar, de alguna manera, la diferencia $\left|T(x_j,t^n)-T_j^n\right|$. En problemas de valores iniciales, que resultan en algoritmos iterativos, puede adoptarse la siguiente definición [4] que se establece si,

$$\left|T(x_j,t^n)-T_j^n\right| \underset{\substack{n\to\infty\\ \Delta x,\Delta t\ fijo}}{<} \infty \quad (15)$$

es decir, la diferencia entre la solución analítica y numérica para cada nodo del eje espacial, permanece acotada cuando se avanza indefinidamente el cálculo en la dirección temporal; manteniendo fijos los intervalos de discretización. Una restricción de este tipo sólo puede proveer, en principio, condiciones necesarias para la estabilidad.

2.3 Solución analítica por el método de separación de variables.

En esta sección desarrollamos un método sencillo para buscar una solución analítica en 2D de la ecuación (4). En este caso, consideramos $\dot{q} = 0$ y en condiciones de isotropía espacial para un plano de lados *L* y *H*. Es decir en coordenadas cartesianas la ec.(4) se transforma en

$$\alpha\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)=\frac{\partial T}{\partial t},\quad 0\le x\le L \ \text{ y } \ 0\le y\le H \quad (16)$$

Entonces, proponemos el método de separación de variables [4], de la forma

$$T(x,y,t)=\nu(x,y)\mu(t) \quad (17)$$

Sustituyendo la ec.(16) en (17), obtenemos

$$\frac{1}{\mu}\frac{\partial\mu}{\partial t}=\frac{\alpha}{\nu}\left(\frac{\partial^2\nu}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\nu}{\partial y^2}\right)=-\lambda \quad (18)$$

donde λ es la constante de separación. Luego se obtienen de las dos ecuaciones

$$\mu'+\lambda\mu=0 \quad (19)$$

y

$$\alpha\nabla^2\nu+\lambda\nu=0 \quad (20)$$

aquí (') significa la derivada con respecto a *t* y el operador ∇ es la derivada con respecto a las coordenadas espaciales *x* y *y*. Luego, por condiciones iníciales y de fronteras de Neumann y Dirichlet, escribimos

$$\mu(0)=\mu_0,\quad \nu(0,y)=\nu_{x0},\quad \nu(L,y)=\nu_{xL},\nu(x,0)=\nu_{y0}\quad \text{y}\quad \nu(x,H)=\nu_{yH}.$$

Luego de (19), obtenemos la solución en el tiempo

$$\mu=\mu_0 e^{-\lambda t}, \quad (21)$$

y para la parte espacial aplicamos nuevamente el método de separación de variables,

$$\nu(x,y)=X(x)Y(y). \quad (22)$$

Sustituyendo la ec.(22) en (20), obtenemos

$$\frac{Y''}{Y}+\lambda=-\frac{X''}{X}=\beta \quad (23)$$

donde β es la constante de separación. Luego, de.(23), obtenemos

$$X=C_1\cos\left(\frac{\beta x}{\alpha}\right)+C_2 sen\left(\frac{\beta x}{\alpha}\right) \quad (24)$$

y

$$Y = C_3 \cos\left(\frac{\delta y}{\alpha}\right) + C_4 sen\left(\frac{\delta y}{\alpha}\right), \qquad (25)$$

donde C_1, C_2, C_3, C_4 son constantes y δ es la constante de separación, la cual tiene la relación $\delta = \lambda - \beta$. Sustituyendo las expresiones (23), (24) en (22) y conjuntamente la expresión (21) en (17), se llega a la solución general:

$$T(x,y,t) = u_0 e^{-\lambda t}\left(C_1 cos\left(\frac{\beta x}{\alpha}\right) + C_2 sen\left(\frac{\beta x}{\alpha}\right)\right)\left(C_3 cos\left(\frac{\delta y}{\alpha}\right) + C_4 sen\left(\frac{\delta y}{\alpha}\right)\right). \qquad (26)$$

Ahora bien, si la ecuación (26) se desea evaluar en una dimensión, hacemos $\delta=0$ y $y=0$, para obtener

$$T(x,t) = T_0 e^{-\lambda t}\left[\left(C_1 cos\left(\frac{\lambda x}{\alpha}\right) + C_2 sen\left(\frac{\lambda x}{\alpha}\right)\right)\right]. \qquad (27)$$

Una solución más simple se obtiene al hacer $C_2=0$

$$T(x,t) = T_0 C_1 e^{-\lambda t} cos\left(\frac{\lambda x}{\alpha}\right). \qquad (28)$$

Donde el producto T_0C_2 representa una sola constante con unidades de temperatura. La expresión (28) es la solución analítica para ser implementada en la simulación de la ec. (2) en 1D.

2.4. Solución analítica en 1D utilizando el manipulador MAPLE.

Otra solución analítica unidimensional se ha obtenido utilizando el lenguaje de programación matemático MAPLE.

Enter a PDE.

$$> \left(\frac{d}{dt}T(x,t)\right) - \alpha\left(\frac{d^2}{dx^2}T(x,t)\right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t) - \alpha\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x,t)\right) = 0$$

$> Solve\ PDE$

$(T(x,t) = _F1(x)_F2(t))\ \&\ Where$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}_F1(x) = _c_1_F1(x), \frac{d}{dt}_F2(t) = \alpha_c_1_F2(t)\right]$$

$> PDEtools\ [build]$

$$T(x,t) = e^{\sqrt{_c_1}\,x}_C_3 e^{\alpha_c_1 t}_C_1 + \frac{_C_3 e^{\alpha_c_1 t}_C_2}{e^{\sqrt{_C_1}X}} \qquad (29)$$

donde C_1, C_2 y C_3 son constantes.

III. ESQUEMA DEL SEUDOCÓDIGO

A continuación se presenta un seudocódigo para resolver la ecuación de transferencia de calor en 1D, con $Q = 0$ considerando el método de diferencias finitas, conjuntamente con la

asignación del dato inicial y las condiciones de fronteras mixtas de Neumann y Dirichlet. Para esto mostramos detalles de la construcción de un seudocódigo en al manipulador y simulador matemático MAPLE.

- *Seudocódigo en MAPLE para la Ecuación de Transferencia de Calor.*

Datos físicos y químicos de la ecuación de calor (en la reducción de aluminio)

$k = 237:$ # Conductividad térmica (W/m.K)

$\rho = 2702:$ # Densidad del material (Kg/m^3)

$C_P = 903:$ # Calor específico (J/Kg.K)

$\alpha = \dfrac{k}{\rho C_P}:$ # Parámetro de la ecuación de calor

Entrada de datos que define el tiempo

$t_0 = 0:$ #Tiempo inicial

$t_f = 1:$ #Tiempo final

$\Delta t = 0.001:$ #Tiempos sucesivos de cálculos

$ntiempo = \dfrac{t_f - t_0}{\Delta t}:$ # Tiempo en el espacio

Entrada de datos que definen el espacio

$x_0 = 0:$ #Punto inicial del alambre

$x_f = :$

$d := 1:$ #Punto final del alambre

$\Delta x = \sqrt{\Delta x \cdot d^2}:$ #Espaciado computacional

$nespacio = \dfrac{x_f - x_0}{\Delta x};$ # Número de puntos espaciales

Condiciones de frontera: Neumann-Dirichlet

for j from 0 to ntiempo do

$T[0, j] := T_0 e^{-\lambda t}$

$T[L, j] := T_0 e^{-\lambda t} cos(\dfrac{\lambda x}{\alpha})$

od:

El dato inicial

for i from 0 to nespacio do

$T[i,0] := T_0 cos(\dfrac{\lambda x}{\alpha}):$

od:

El programa

for j from 1 to ntiempo-1 do

for i from 1 to nespacio-1 do

$T[i, j+1] := T[i, j] +$

$\dfrac{\Delta t \cdot \alpha}{\Delta x^2} \cdot (T[i+1, j] - 2 \cdot T[i, j] + T[i-1, j])$

od:

od :

IV. MODELAJE Y SIMULACIÓN EN PDETOOL

La simulación en PDETOOL de MATLAB se realizó con los parámetros del aluminio dados en (Cengel, 2004; Incropera, 1996) las tablas 1, 2, 3 y 4 de características internas de los materiales el INCROPERA, usando un corte transversal de la celda de reducción tipo rectángulo laminar 2D de aluminio.

Tabla 1. Parámetros de la ec. de transferencia de calor.

Siglas	*Descripción*	*Magnitud*	*Unidades*
rho	Densidad	2072	Kg/m³
C	Capacidad calórica	903	J/KgºK
K	Coef. de transf. de calor	237	w/mºK
Q	Origen de calor	0	ºC
h	Coef. de conv. de transf. calor	1	
Text	Temp. Externa	40	ºC

Tabla 2. Condiciones de borde superior (Dirichlet).

Siglas	*Descripción*	*Magnitud*	*Unidades*
g	Flujo de calor	0	
q	Coef. de transf. de calor	0	w/mºK
h	Coef. de conv. de transf. calor	1	
r	Aporte de calor	960	ºC

Tabla 3. Condiciones de borde inferior (Dirichlet).

Siglas	*Descripción*	*Magnitud*	*Unidades*
g	Flujo de calor	0	
q	Coef. de transf. de calor	0	w/mºK
h	Coef. de conv. de transf. calor	1	
r	Aporte de calor	660	ºC

Tabla 4. Condiciones de borde laterales (Neumann).

Siglas	*Descripción*	*Magnitud*	*Unidades*
g	Flujo de calor	0	
q	Coef. de transf. de calor	0	w/mºK
h	Coef. de convecc. de transf. de calor	1	
r	Aporte de calor	0	ºC

En las figuras 3 y 4 se muestra la variación de temperatura entre 10 y 50 segundos. En las figuras 5 y 6, luego de transcurrir 500 segundos, se observa la uniformidad en los rangos de temperatura de 950ºC hasta 700ºC, el aluminio se encuentra en su fase liquida.

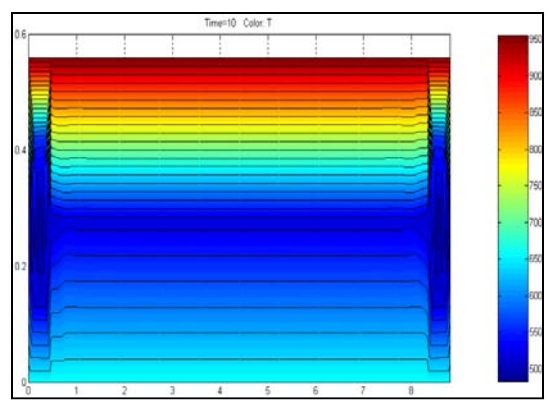


Figura 3. Simulación PDETOOL a los 10 segundos.

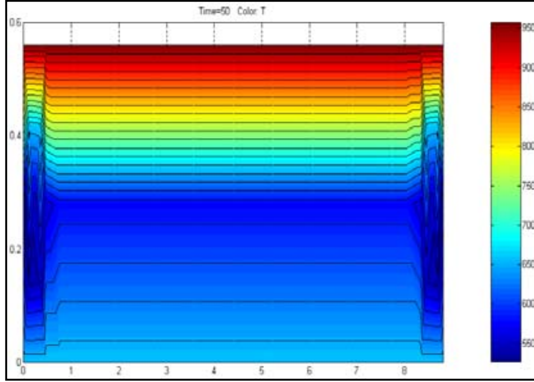


Figura 4. Simulación PDETOOL a los 50 segundos.

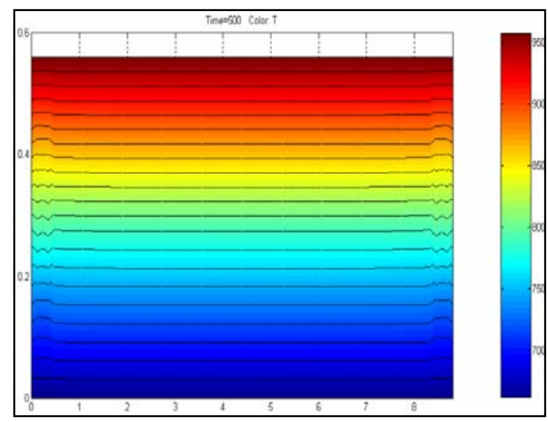


Figura 5. Simulación PDETOOL a los 500 segundos.

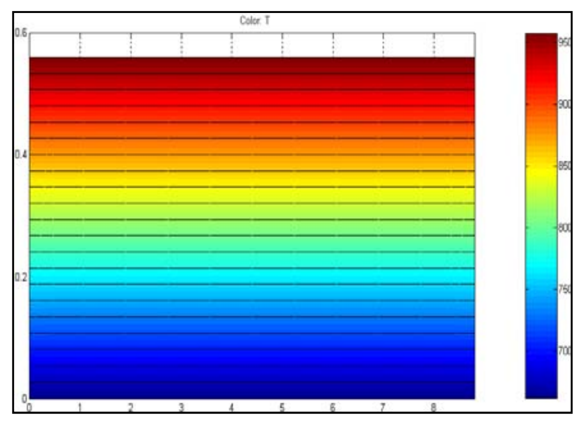


Figura 6. Simulación PDETOOL a los 1000 segundos.

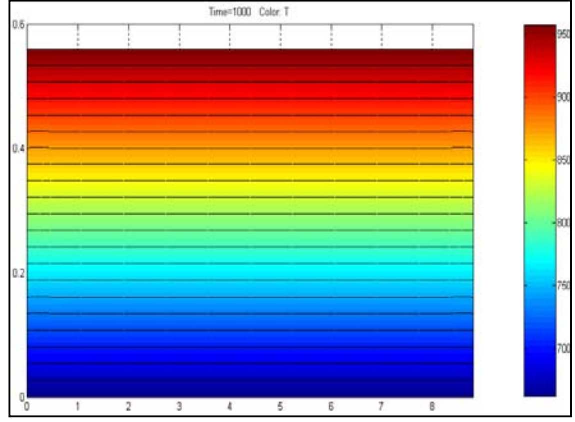


Figura 7. Perfil de temperatura en periodo permanente.

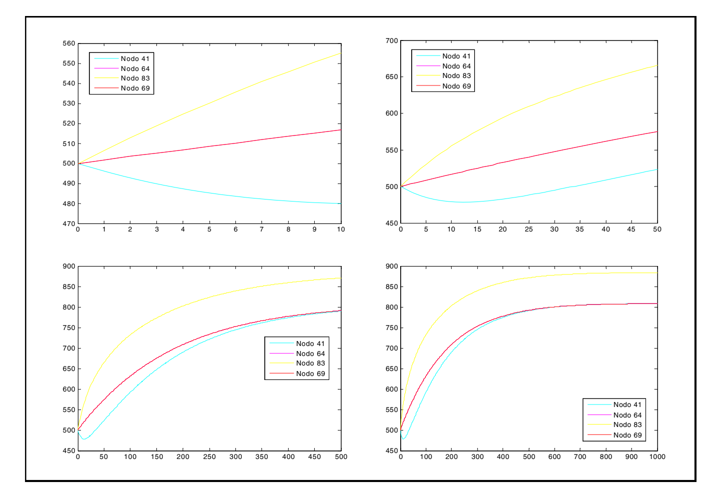


Figura 8. Variación de temperatura en nodos centrales.

Las curvas de comportamiento térmico en los nodos centrales de la placa de aluminio líquido indican que la temperatura se estabiliza. En la figura 8, se observa que la estabilidad en los nodos 41 y 69 se obtiene después de los 400 segundos de reacción en la celda electrolítica.

Todas estas gráficas son el resultado de la simulación del módulo de tratamiento de ecuaciones diferenciales PDETOOL de Matlab y muestran el comportamiento de una sección transversal o lámina rectangular de la celda de reducción de aluminio Hall-Héroult.

V. MODELAJE Y SIMULACIÓN EN 1D CON MAPLE

En esta sección partimos del hecho de que la solución numérica difiere de la solución analítica debido a dos causas: el error de truncamiento y los errores de redondeo. Además, se asume que la solución numérica es convergente al afinar la malla de cálculo y disminuir el error de truncamiento, mientras los errores de redondeo permanecen bajo control. En el estudio numérico y analítico de la ecuación de transferencia de calor en 1D se implementó un algoritmo numérico en MAPLE, bajo las condiciones iniciales y de frontera de Dirichlet y Neumann:

- Frontera con la solución de la ecuación (26)

$$T(0,t) = T_0 e^{-\lambda t}, \quad T(L,t) = T_0 e^{-\lambda t} cos(\frac{\lambda L}{\alpha}) \quad \text{y}$$

$$T(x,0) = T_0 \cdot cos(\frac{\lambda x}{\alpha}) \qquad (30)$$

- Frontera con la solución (27)

$$T(0,t) = C_1C_3e^{\alpha C_1 t} + C_2C_3e^{\alpha C_1 t} \quad \text{y}$$

$$T(L,t) = C_1C_3e^{\alpha C_1 t}e^{\sqrt{C_1 L}} + \frac{C_2C_3e^{\alpha C_1 t}}{e^{\sqrt{C_1 L}}} \quad \text{y}$$

$$T(x,0) = C_1C_3e^{\sqrt{C_1}\ x} + \frac{C_2C_3}{e^{\sqrt{C_1}\ x}}. \qquad (31)$$

Con el fin de validar los resultados numéricos y analíticos, seleccionamos $\Delta x = 0.018$ y un $\Delta t = 0.001$; los cuales mejoraron el refinamiento de los puntos en el tiempo.

En las figuras 9, 10 y 11 se muestra la solución numérica con línea de puntos negros y la solución analítica en línea sólida de la ec. (31), del mismo modo, las figuras 12, 13 y 14 detallan el valor absoluto de la diferencia entre las dos soluciones planteadas. En estas gráficas se muestra la convergencia de la solución numérica con la solución analítica, la cual indica que el error global de truncamiento es muy pequeño para los tiempos de (0, 10 y 100 segundos respectivamente).

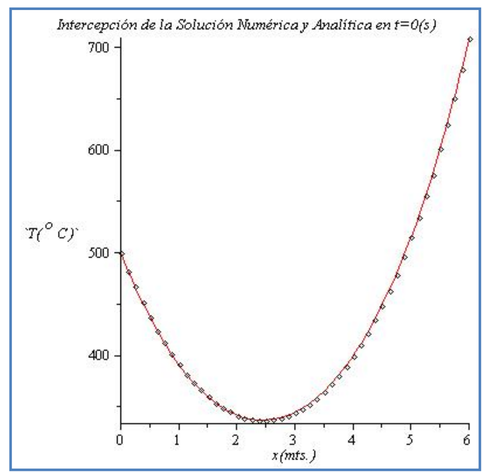


Figura 9.Solución analítica & numérica a 0 seg.

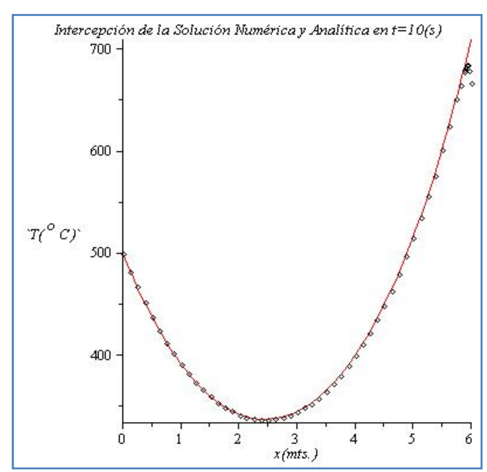


Figura 10. Solución analítica & numérica a 10 seg.

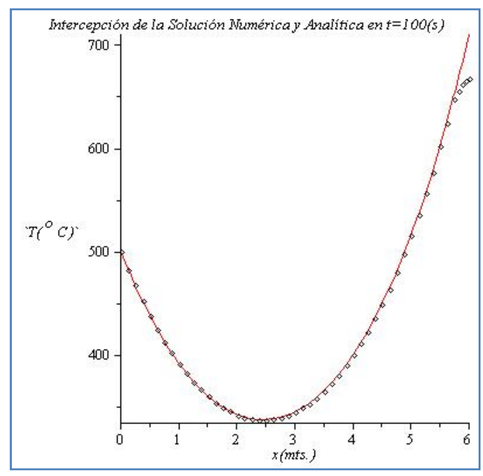


Figura 11. Solución analítica & numérica a 100 seg.

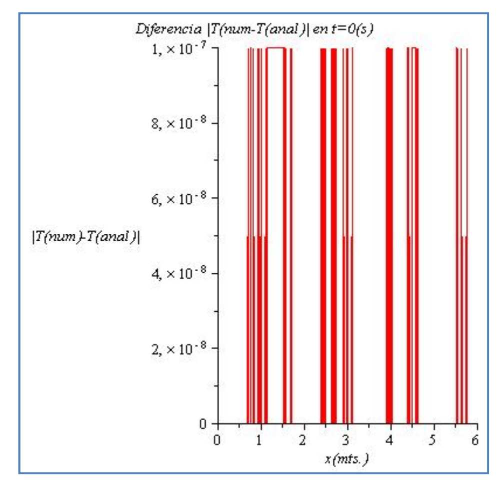


Figura 12. Diferencia de analítica y numérica a los 0 seg.

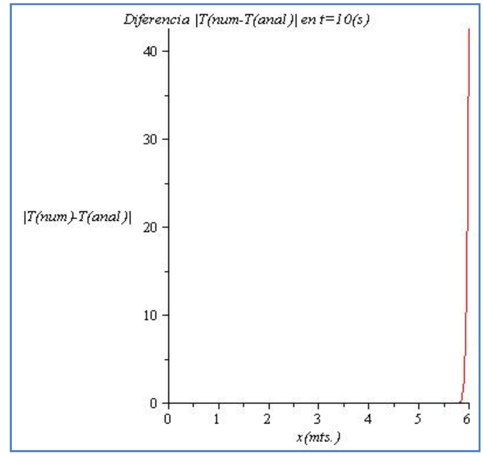


Figura 13. Diferencia de analítica y numérica a los 10 seg.

•

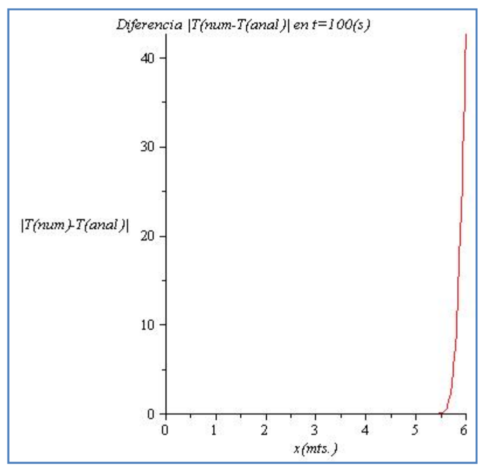


Figura 14. Diferencia de analítica y numérica a los 100 seg

Con el fin de ampliar sobre los errores que describen la convergencia y estabilidad de las soluciones de la ecuación de transferencia de calor, se prueban las condiciones iniciales y de frontera de la ec. (30).

La implementación del método de separación de variables se describe gráficamente en las figuras 15, 16 y 17, donde se muestra la solución analítica de la ecuación de transferencia de calor con línea sólida y la solución numérica en puntos negros para una corrida de 0, 10 y 100 segundos respectivamente. Del mismo modo, en las gráficas 18, 19 y 20 se muestra el valor absoluto de la diferencia entre la solución analítica y la solución numérica para los tiempos de 0, 10 y 100 segundos respectivamente Aquí se puede ver una gran aproximación de la solución numérica con la analítica.

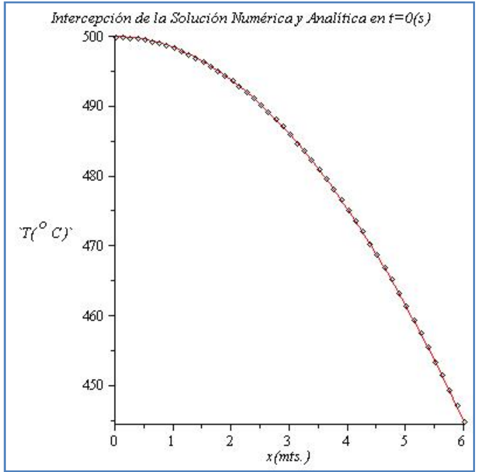


Figura 15. Método de separación de variables 0 seg.

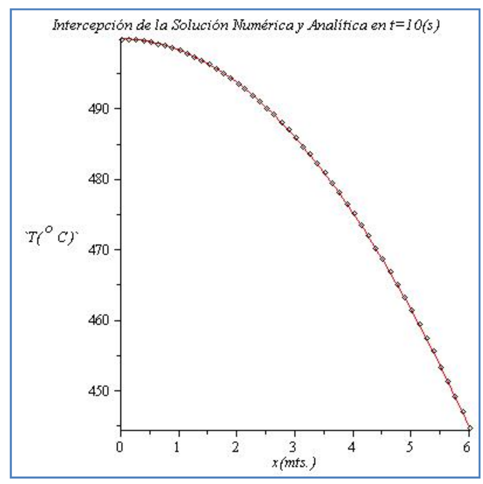


Figura 16. Método de separación de variables 10 seg.

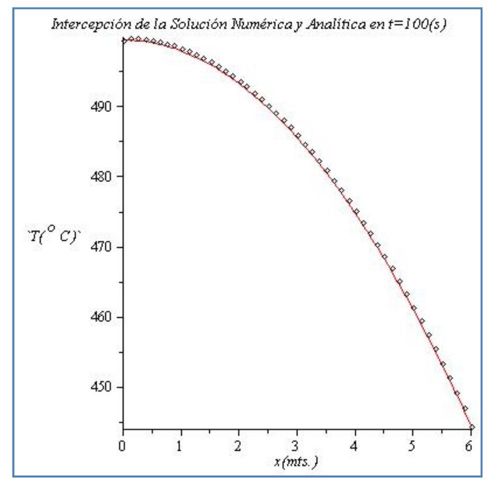


Figura 17. Método de separación de variables 100 seg.

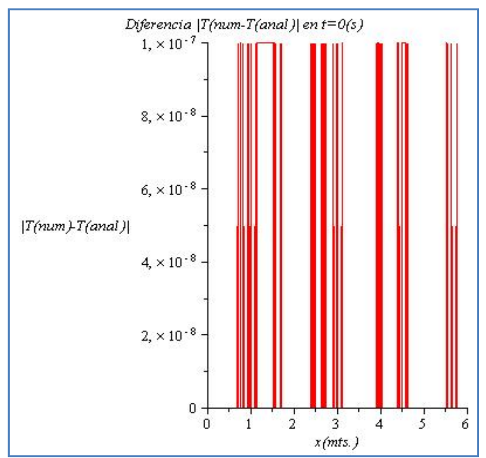


Figura 18. Separación de variables $|An - num|$ 0 seg.

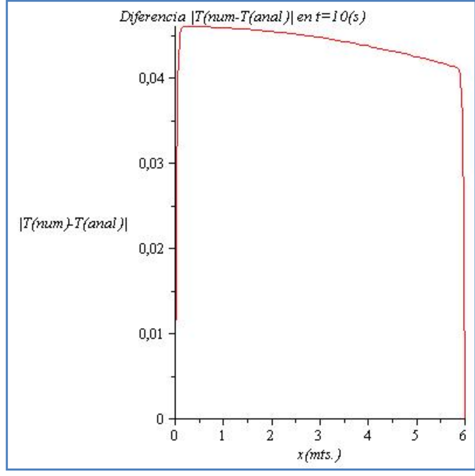


Figura 19. Separación de variables $|An - num|$ 10 seg

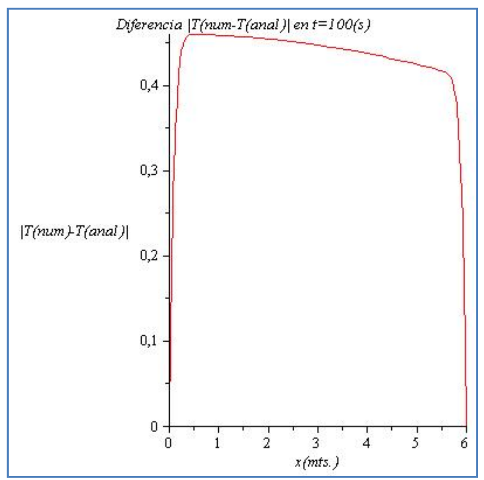


Figura 20. Separación de variables $|An - num|$ 100 seg.

El problema de estabilidad de un algoritmo consiste en analizar la sensibilidad de los resultados a pequeñas variaciones en los datos de entrada. En términos laxos, se denomina estable a aquél cuyos resultados muestran poca sensibilidad a esas variaciones y viceversa. Obviamente, estas consideraciones requieren ser expresadas con mayor rigor matemático. Con Fundamento en lo expuesto anteriormente, se observa que, para ambos casos, la diferencia $|An - num|$ en t=*0seg*, es muy pequeña (10^{-8}), este valor puede ser tomado como un cero.

Para hacer esta evaluación se somete a prueba tomando la ecuación (31) y variando el parámetro de la constante C_1. Primero se evalúa con 0.15 en espacio tiempo y luego, se reduce la constate a 0.015, es decir, diez veces menos. Las gráficas de la figura 21 muestran que la solución numérica para $T(x,t)$ cambia drásticamente ante las variaciones de C_1.

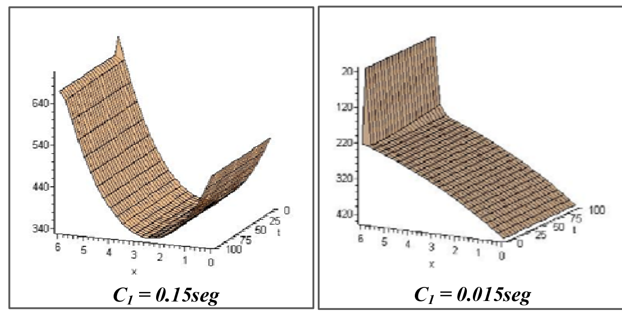


Figura 21. Temperatura en la coordenada espacial y el tiempo para C_1=0.15 y 0.015

VI. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

En las gráficas de las figuras 9, 10 , 11, 12, 13 y 14; se muestra la convergencia de la solución numérica con la solución analítica de la ecuación (31), la cual indica que el error global de truncamiento es muy pequeño. Por lo tanto, se puede confirmar que la solución numérica converge a la solución analítica. Este resultado muestra una línea de material que se enfría en un corto tiempo y hacia el centro de la línea y luego, comienza a calentarse. No obstante, las figuras 15, 16, 17, 18, 19 y 20 muestran una buena convergencia, pero, el material tiende a enfriarse en el tiempo.

Hay dos posibilidades para determinar la causa de la inestabilidad, presente en la figura 21. La primera es que sea una característica del problema que puede reflejar, por ejemplo, una inestabilidad física, en cuyo caso se trata de un problema mal condicionado o matemáticamente inestable; en nuestro caso, la comparación del comportamiento de la temperatura para el valor de la constante $C_1=0.15$, con el comportamiento, para $C_1=0.015$, denota una característica del problema. La segunda posibilidad, más común que la anterior, es que el algoritmo esté pobremente construido; entonces, se estaría en el caso de un algoritmo mal condicionado o numéricamente inestable.

VII. CONCLUSIONES

Estimamos que para disminuir el error de truncamiento, se recalcule los resultados con el truncado efectuado en un nivel superior (por ejemplo, incluyendo más términos en la evaluación de una serie). En este caso desarrollar fórmulas que den cuenta, a menos, de la dependencia de los errores de truncamiento respecto de los parámetros del problema, por ejemplo, el número de términos utilizado en la evaluación de una serie.

La simulación en PDETOOL facilita la visualización del intercambio de calor en las diferentes capas que componen el proceso de reducción de aluminio, gráficamente se observa la interacción entre los contornos que aportan o no aportan calor al proceso de reducción de aluminio, en los periodos transitorios y permanentes.

La ecuación diferencial utilizada para simular el proceso de reducción de aluminio, nos muestra que es convergente en el periodo permanente, por mostrar la temperatura en forma constante con un diferencial pequeño en el tiempo. Se puede concluir que la validación de las soluciones numéricas y analíticas depende de los datos asignados a las constantes de integración y al modelo desarrollado.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

[1] *Principles of the Hall-Héroult*. www.peter-entner.com/E/Theory/PrincHH/PrincHH.aspx (23/07/2013).
[2] Gutiérrez, E. y Troyani, N. (1999). *Formulación Variacional del Problema Termoeléctrico de una Celda de Reducción de Aluminio Hall-Heroult en tres dimensiones*, UCT UNEXPO vol. 2, pp. 34-42 Puerto Ordaz, Venezuela.
[3] Gutiérrez, E. y Troyani, N. (2004). *Determinación de la distribución de temperatura mediante el método de sustitución de dominio en el lecho de las celdas de reducción de aluminio del tipo Hall-Héroult*. Mecánica Computacional Vol. XXIII, pp. 2381-2390. Bariloche, Argentina, Noviembre 2004.
[4] Zwillinger, D. (1997). *Handbook of Differential Equations, 3erd edition*, Academic Press.
[5] Cengel, Y. (2004). *Transferencia de calor.* Delegación Cuauhtémoc, México. Editorial. Interamericana McGraw-Hill. 2da Edición.
[6] Incropera, F. (1996). *Fundamentos de transferencia de calor.* Naucalpan de Juárez, México. Editorial Pearson Prentice Hall, 4ta Edición.
[7] Planos de celda de Alcasa. *KATHODENWANNE TYP..A¨ BLATTI POT SHEL (SHEET I)*. Aluminios del Caroní. ALCASA. Puerto Ordaz, Venezuela.